

углерода без нарушения вакуума в криостате при конденсации такие, что единственный объем образовавшейся при кристаллизации газогидратной фазы содержит 150–170 объемов газообразного диоксида углерода. То есть содержали до 20–23 масс % диоксида углерода. Для метана же удалось получить 10–15 масс % (120–160 объемов), для пропана 10–13 масс % (50–70 объемов)

Результаты исследования показывают успешность применения метода конденсации молекулярных пучков для получения газовых гидратов. В перспективе метод может быть использован при получении гидрата водорода для решения проблемы его хранения и транспорта в связи с развитием водородной энергетики. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-08-31007 мол_а).

1. Накоряков В.Е., Донцов В.Е., Чернов А.А. Образование газовых гидратов в газожидкостной смеси за ударной волной // Доклады РАН, 2006.т. 411, № 2. с. 190–193.
2. Файзуллин М.З., Решетников А.В., Коверда В.П. Синтез гидрата метана при низкотемпературной конденсации молекулярных пучков // Докл. РАН. 2010. Т. 433. № 5. С. 622–624.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Бадртдинов Д.И.^{*}, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: reason2205@ya.ru

Сильнокоррелированные соединения представляют значительный интерес для исследователей благодаря уникальным характеристикам, которые могут быть применены в разработке новых технологий [1], и здесь магнитные взаимодействия играют немаловажную роль в формировании свойств этих систем. Существует ряд методов для расчета обменного взаимодействия. Среди них можно выделить схемы расчета, основанные на разности энергий состояний с разными магнитными конфигурациями, или методы, предполагающие определение магнитных взаимодействий через функции Грина в базисе атомных орбиталей.

Целью данной работы является разработка вычислительного комплекса для расчета обменного взаимодействия модели Гайзенберга в базисе Ванье функций. В реальных соединениях наблюдается сильная гибридизация между металлами и лигандами, что хорошо видно на примере оксида никеля (NiO), где происходит перекрытие волновых функций d-оболочек никеля с p-оболочками кислорода (рис. 1). Это приводит к делокализации магнитного момента и изме-

нению значения обменного взаимодействия, которое необходимо учитывать. В рамках работы расчет был проведен в формализме функций Грина [2] с построением модельного гамильтониана в базисе Ванье функций, спроецированных на d-орбитали атома Ni.

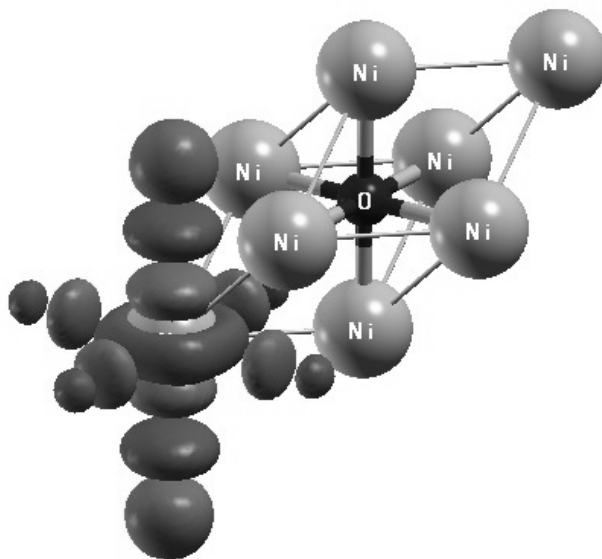


Рис. 1. $3dz^2$ -орбиталь атома никеля в структуре NiO

Полученные значения магнитного взаимодействия хорошо согласуются с результатами работы [3]. В дальнейшем предполагается продолжение исследования подобных систем.

1. Nakano M., Shibuya K., Okuyama D., Nature, **487**, 459-462 (2012)
2. Mazurenko V.V., Anisimov V.I. Phys. Rev. B **71**, 184434 (2005)
3. Oguchi T., Terakura K., Williams A.R. Phys. Rev. B **28**, 11 (1983)

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НА ГРАНИЦЕ ВОДНЫЙ РАСТВОР ГЛИЦЕРИНА - СИЛИКОНОВОЕ МАСЛО

Бандо Р.Д.^{*}, Мартюшев Л.М.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: romanbando@gmail.com

Структурообразование при вытеснении в ячейке Хеле-Шоу представляет большой интерес как для теории неравновесных процессов (это одновременно и простейшая, и аналитически содержательная модель), так и для практики (подземная гидравлика, нефтедобыча). Согласно недавним теоретическим расчетам [1] при вытеснении несмешивающихся жидкостей с близкими вязкостями возможно появление ряда нетривиальных явлений, которые ранее не наблюдались.